Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Кароль Петр Андреевич

Построение и исследование C–оптимальных планов для полиномиальных моделей с нулевым свободным членом

Выпускная квалификационная работа

Научный руководитель:
д. ф.-м. н. профессор В. Б. Мелас

Рецензент:
к. ф.-м. н., доцент П. В. Шпилев

Санкт-Петербург
2018

Saint Petersburg State University
Applied Mathematics and Computer Science
Computational Stochastics and Statistical Models

Karol Petr Andreevich

Constructing and investigating C–optimal designs for polynomial models without intercept

Graduation Project

Scientific Supervisor:
Professor V. B. Melas

Reviewer:
Associate Professor P. V. Shpilev

Saint Petersburg
2018

Оглавление

Введение

В течение долгого времени проведение эксперимента для получения статистических данных проводилось без какого-либо предварительного планирования. Способы, время и место проведения экспериментов определялись экспериментаторами интуитивно, без научно обоснованной методики. Вместе с тем, развитие науки и совершенствование техники существенно увеличило стоимость экспериментальных исследований. Это привело к необходимости создания математического аппарата, позволяющего осуществлять рациональный выбор условий проведения эксперимента. Таким аппаратом стала теория планирования эксперимента [1][2][3].

В работе решается задача по нахождению двух специальных типов С-оптимальных планов: экстраполяции и для оценивания производной в модели полиномиальной регрессии без свободного члена. Для обычных полиномиальных моделей планы экстраполяции были изучены еще в 1960-ых годах [4], а планы для оценивания производной — в недавней работе научного руководителя [5].

Во многих случаях нулевой отклик, то есть начальное положение объекта экспериментирования, уже известен или эта информация нам не важна. Например, работа систем экстренного торможения не зависит от участка трассы, на котором она используется, а при вычислении параметров запуска ракеты всегда известно, с какого космодрома она будет запущена. Поэтому интерес представляют полиномиальные модели $y = \theta_0 + \theta_1 x + \ldots + \theta_n x^n$ с заранее заданным θ_0. При введении нового отклика $y_{new} = y - \theta_0$ получаем регрессионную полиномиальную модель с нулевым свободным членом. Такие модели еще мало исследованы.

В ходе работы проведено сравнение C и D–оптимальных планов.

Работа состоит из четырех глав.

В первой главе определены следующие понятия: регрессионная модель; план эксперимента; критерии D и C– оптимальности; сформулирована теорема Элвинга, которая применяется для исследования критерия C–оптимальности.

Во второй главе исследованы планы экстраполяции. Показано, что решение задачи существенно различается для моделей четной и нечетной степеней. Найдено в явном виде решение для квадратичной и модели четвертой степени. Сформулирована и доказана теорема для общего случая.

В третьей главе рассматриваются планы для оценивания производной. Получены явные решения для моделей порядка 2, 3. Для модели 4–ой степени в некоторых точках построен план аналитически, в остальных приведен алгоритм нахождения оптимального плана.

В четвертой главе проведено сравнение оптимальных планов экстраполяции и D–оптимальных планов, а также сравнение планов для оценивания производных с D–оптимальными для моделей четвертого порядка.

Глава 1

Основные понятия

1.1. Регрессионная модель

Определение 1. Рассмотрим уравнения регрессии:

$$y_i = \eta(t_i, \theta) + \epsilon_i,\ i = 1, ..., N.$$

- $y_1, ..., y_N$ — случайные величины, также называемые откликом, которые являются результатами эксперимента;
- $\eta(t_i, \theta)$ — функция регрессии;
- $\theta = (\theta_1, ..., \theta_n)^{\mathrm{T}}$ — неизвестный параметр функции, n — их количество;
- $\epsilon_1, ..., \epsilon_N$ — случайные величины с нулевым математическом ожиданием, характеризующие ошибки наблюдений;
- $t_1, ..., t_N$ — точки множества планирования χ (условие проведения эксперимента).

Эти уравнения часто используются при планировании и анализе экспериментов во многих прикладных научных исследованиях (экспериментальная химия, микробиология и т.п.). Цель: найти условия планирования, позволяющие достичь наилучших результатов измерения за наименьшее количество испытаний.

Существует множество возможных методов оценки параметров. Например:

$$\max_j |y_j - \eta(t_j, \theta)| \longrightarrow \min_\theta,$$

или, наиболее распространенный, метод наименьших квадратов (МНК):

$$\sum_{i=1}^{N} (y_i - \eta(t_i, \theta))^2 \longrightarrow \min_\theta .$$

Точность этих оценок можно улучшить, выбрав подходящие условия проведения эксперимента, которые записываются в виде таблицы:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} t_1 & \cdots & t_m \\ \omega_1 & \cdots & \omega_m \end{pmatrix}.$$

Здесь $\sum_{i=1}^{m}\omega_i = 1$, в этом случае в точке t_i проводится, приблизительно $N\omega_i$ измерений, где N — количество измерений.

Вектор регрессионных функций $f(t)$ зададим с помощью следующего равенства: $\eta(t,\theta) = \theta^{\mathrm{T}} f(t)$.

1.2. Информационная матрица и критерий D–оптимальности

Определение 2. Информационной матрицей плана ξ называется матрица $M(\xi) = \int f(t) f^{\mathrm{T}}(t)\xi(dt)$, $f(t) = (f_1(t), \ldots, f_n(t))^{\mathrm{T}}$.

Эта матрица имеет следующие свойства [2]:

- любая информационная матрица неотрицательно определена;
- если $m < n$, то $\det M(\xi) = 0$.

Планы, для которых $\det M(\xi) \neq 0$, называются невырожденными. Дисперсионной матрицей такого плана будем называть матрицу

$$D(\xi) = M(\xi)^{-1}.$$

Определение 3. Критерий D-оптимальности имеет вид:

$$\log\det D(\xi) \longrightarrow \min_{\xi}.$$

Этот критерий соответствует минимизации объема доверительного эллипсоида, накрывающего истинный вектор параметров.

1.3. Критерий C–оптимальности

Определение 4. План ξ называется C–оптимальным, если он минимизирует величину $\Phi(\xi)$, где

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} c^{\mathrm{T}} M^{-}(\xi) c, & \text{если } \exists v : c = M(\xi)v; \\ \infty, & \text{иначе,} \end{cases}$$

где $M^{-}(\xi)$ обобщенно-обратная матрица для информационной матрицы $M(\xi)$.

Если для плана ξ существует вектор $v : c = M(\xi)v$, то такой план называется допустимым.

Этот план минимизирует дисперсию МНК оценок линейной комбинации параметров $\theta^{\mathrm{T}}c$. Вектор c влияет на вид оптимального плана.

Определение 5. Планом экстраполяции назовем C–оптимальный план с вектором $c^{\mathrm{T}} = (f_1(z), \ldots, f_n(z))$. Такой план рассматривается в точках $z \notin \chi$.

Определение 6. Планом оценивания производной назовем C–оптимальный план с вектором $c^{\mathrm{T}} = (f_1'(z), \ldots, f_n'(z))$. Такой план рассматривается для $z \in \mathbb{R}$.

В этих определениях и далее, для краткости, опущено слово «оптимальный» у планов экстраполяции и планов для оценивания производной.

В моей работе рассмотрены планы экстраполяции, то есть планы для оценки значения функции регрессии в точке z. Это соответствует выбору в качестве c вектора $c^{\mathrm{T}} = (f_1(z), \ldots, f_n(z))$. Эта задача рассмотрена для $z \notin \chi$, то есть не принадлежащих промежутку планирования, так как у нас и так есть возможность провести там измерение.

Также существует задача не только оценки значения функции регрессии в точке, но и ее производной. Например, данный подход можно использовать, чтобы выяснить какое ускорение у автомобиля в какой-либо момент времени, или, под каким углом нужно выпустить снаряд с данной скоростью, чтобы попасть в цель. Поэтому в моей задаче, также, рассмотрен случай вектора $c^{\mathrm{T}} = (f_1'(z), \ldots, f_n'(z))$. Эта задача изучена на всем промежутке вещественных чисел.

1.3.1. Теорема Элвинга

Теорема 1 ([5], стр.(617),[6])**.** Пусть выполнены следующие условия:

- функции $f_1(x), ..., f_n(x)$ определены и непрерывны на компактном множестве χ;
- ошибки удовлетворяют стандартным условиям некоррелированности, несмещенности и равноточности;
- существует хотя бы один допустимый план.

Тогда существует вектор p, h и план ξ,

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_m \\ \omega_1 & \omega_2 & \cdots & \omega_m \end{pmatrix}, \ \sum_{i=1}^{m} \omega_i = 1,$$

который удовлетворяет следующим условиям:

1. $|p^{\mathrm{T}} f(x)| \leq 1, x \in \chi$;

2. $|p^{\mathrm{T}} f(x_i)| = 1, i = 1, 2, \ldots, m$ для некоторого $m \leq n$;

3. $c = h \sum_{i \in 1:m} f(x_i) \omega_i p^{\mathrm{T}} f(x_i)$.

Любой план указанного вида является C–оптимальным тогда и только тогда, когда выполнены условия 1–3 для некоторых p и h. Многочлен из теоремы Элвинга будем называть экстремальным многочленом (в задаче построения C–оптимального плана).

Кроме того, из этой теоремы следует, что для C–оптимального плана ξ^*:

$$c^{\mathrm{T}} M^{-}(\xi^*) c = h^2.$$

Глава 2

Планы экстраполяции

В настоящей главе изучаются планы экстраполяции для модели полиномиальной регрессии без свободного члена. В первом параграфе мы изложим классический результат о планах экстраполяции, дающий полное решение задачи для случая полиномиальной регрессии со свободным членом. В этом случае существует единственный план экстраполяции, опорными точками которого являются экстремальные точки многочлена Чебышева (первого рода), степень которого совпадает со степенью полиномиальной модели, а число опорных точек плана равняется числу параметров модели, то есть равно порядку многочлена плюс 1. Для случая модели без свободного члена есть существенные отличия. Прежде всего, приходится различать модели четной и нечетной степени. Для модели нечетной степени план экстраполяции в модели со свободным членом является также и планом экстраполяции для модели без свободного члена. Но это решение не единственно и существует еще одно с числом точек на единицу меньшим. Это связано с тем, что многочлен Чебышева нечетной степени не имеет свободного члена и является экстремальным многочленом для модели без свободного члена. Для четных степеней решение более сложное, так как в этом случае соответствующий многочлен Чебышева имеет ненулевой свободный член и не может быть экстремальным многочленом в задаче экстраполяции.

2.1. Планы экстраполяции для классической полиномиальной модели

Пусть $f^T(x) = (1, x, \dots, x^n)$. В этом случае справедлива теорема [7], которую можно сформулировать следующим образом.

Теорема 2 ([7], стр.348)**.** Для такой задачи существует единственный оптимальный план. Этот план сосредоточен в экстремальных точках многочлена Чебышева степени n, обозначим эти точки через $x_1^*, \dots, x_{n+1}^*$. Весовые коэффициенты этих точек равны:

$$\omega_i = \frac{|L_i(z)|}{\sum_{j=1}^{n+1} |L_j(z)|}, i = 1, \dots, n+1,$$

где $L_1, \ldots, L_{n+1}$ — интерполяционные многочлены Лагранжа, построенные по точкам $x_1^*, \ldots, x_{n+1}^*$.

Единственность плана экстраполяции в этом случае вытекает из следующей известной теоремы.

Теорема 3 ([8] стр. 417)**.** Существует единственный многочлен степени n, который достигает своего максимального по абсолютной величине значения на интервале $[-1, 1]$ равного 1 в $n + 1$ точке. Это есть многочлен Чебышева 1-го рода.

В следующих параграфах мы получим аналоги этого решения для модели без свободного члена.

Итак, рассматривается регрессионная модель со следующим полиномиальным вектором n регрессионных функций:

$$f(x) = (x, x^2, \ldots, x^n)^{\mathrm{T}},\ x \in [-1, 1] \text{ то есть } \chi = [-1, 1].$$

2.2. Построение планов экстраполяции для моделей произвольной нечетной степени

Пусть $x_1, \ldots, x_{2k+1}$ — любые из $2k+2$ экстремальных точек многочлена Чебышева первого рода $2k+1$–ой степени, включающие либо -1, либо $+1$. Обозначим через $L_i(x)$— интерполяционные многочлены без свободного члена, $i = 1, \ldots, 2k + 1$, построенные по точкам $x_1, \ldots, x_{2k+1}$:

$$L_i(x) = \frac{x \prod_{j \neq i}(x - x_j)}{x_i \prod_{j \neq i}(x_i - x_j)}$$

Обозначим:

$$\omega_i(z) = \frac{|L_i(z)|}{\sum_{j=1}^{2k+1} |L_j(z)|},\ i = 1, \ldots, 2k + 1. \tag{2.1}$$

Теорема 4. План с опорными точками $x_1, \ldots, x_{2k+1}$ и весами $\omega_1, \ldots, \omega_{2k+1}$ является оптимальным планом экстраполяции для оценки значения функции регрессии в точке z для полиномиальной регрессионной модели степени $2k + 1$ без свободного члена.

Доказательство: Пусть $c = f(z)$. Обозначим $F = (f_i(x_j))_{i,j=1}^{2k+1}$, где f_i–i-ая компонента функции регрессии. Определим $\overline{\omega_i} = \omega_i(p^{\mathrm{T}} f(x_i))$, где $p^{\mathrm{T}} f(x)$— экстремальный многочлен для задачи экстраполяции. Заметим, что в силу теоремы о единственности (теорема 3) в данном случае $p^{\mathrm{T}} f(x)$ есть многочлен Чебышева степени $2k+1$. Для этого многочлена $p^{\mathrm{T}}f(x) = (-1)^i\xi$, где $= 1$, если план включает точку 1, и -1, если точку -1. В силу третьего пункта теоремы Элвинга получаем.

$$\overline{\omega_i} = e_i^{\mathrm{T}} F^{-1} c/h,\ i = 1, \ldots, 2k+1,$$

$e_i = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)$, где 1 находится на i–ом месте.

Докажем, что $e_i^{\mathrm{T}} F^{-1} f(z) = L_i(z),\ i = 1, \ldots, 2k+1$. В векторной записи это означает, что $F^{-1}f(z) = (L_1(z), \ldots, L_{2k+1}(z))^{\mathrm{T}}$. Домножив обе части этого равенство слева на матрицу F, получаем, что $(z, \ldots, z^n)^{\mathrm{T}} = F \cdot (L_1(z), \ldots, L_{2k+1}(z))^{\mathrm{T}}$. Запишем это равенство для компоненты q:

$$z^q = \sum_{j=1}^{2k+1} z_j^q L_j(z),\ q = 1, \ldots, 2k+1. \tag{2.2}$$

Обе части этого равенства являются многочленами степени не выше $2k+1$. Достаточно проверить равенство этих выражений в $2k+2$ разных точках. Наши интерполяционные многочлены $L_i(x)$ удовлетворяют следующим условиям:

$$\begin{cases} L_i(x_i) = 1, \\ L_i(x_j) = 0,\ i \neq j, \\ L_i(0) = 0. \end{cases}$$

Поэтому равенство (2.2) очевидно выполняется в $2k+2$ разных точках $0, x_1, \ldots, x_{2k+1}$.

Таким образом, для определенных выше весов и точек выполняются все три условия теоремы Элвинга. Следовательно такой план является оптимальным планом экстраполяции.

2.3. Случай $n = 2$

Воспользуемся теоремой Элвинга: Экстраполяционные многочлены $P(x)$, удовлетворяющие свойствам $|P(x)| \leq 1$; $|P(x)| = 1$ в 2 точках находится очевидным образом: $P_1(x) = x^2$ и $P_2(x) = x$. Рассмотрим многочлен $P(x) = x^2$. Точки оптимального плана: $-1,\ 1$.

Веса для точки $z \notin [-1, 1]$ в этом случае находятся аналогично формуле (2.1): $L_1(z) = \dfrac{z \cdot (z-1)}{-1-1}$; $L_2(z) = \dfrac{z \cdot (z+1)}{1+1}$ Нас интересует промежуток: $(-\infty, -1) \cup (1, \infty)$.

На этом промежутке $|L_1(x)| + |L_2(x)| = x^2$. $\omega_1 = \dfrac{|L_1(z)|}{|L_1(z)| + |L_2(z)|} = 0.5 - \dfrac{1}{2z}$; $\omega_2 = \dfrac{|L_2(z)|}{|L_1(z)| + |L_2(z)|} = 0.5 + \dfrac{1}{2z}$. Оптимальный план:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0.5 - \frac{1}{2z} & 0.5 + \frac{1}{2z} \end{pmatrix}.$$

Можно проверить, что второй многочлен не дает решения для задачи экстраполяции, но он потребуется нам для задачи построения оптимального плана для оценивания производной в главе 4.

2.4. Случай $n = 4$

2.4.1. Нахождение опорных точек плана

Будем использовать теорему Элвинга. Найдем такой многочлен степени 4: $g(x) = ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx$, который на отрезке $[-1, 1]$ принимает значения $|g(x)| \leq 1$, при этом равенство достигается в 4-х точках. Найдем такой многочлен, в котором коэффициенты a, b, c, d и будут составлять коэффициенты вектора p. Предположим, что этот многочлен должен быть четной функцией (аналогично многочленам Чебышева четной степени). Тогда $g(x) = ax^4 + bx^2$. Заметим, что $g(-1) = g(1) = 1$. Запишем соотношение между a и $b : b = -(a-1)$. Итого получаем общий вид такого многочлена: $g(x) = ax^4 - (a-1)x^2$. Осталось лишь найти коэффициент a и сами точки оптимального плана.

Заметим, что значение многочлена в двух других точках экстремума будут равняться -1, т.к. $|g(x)| \leq 1$, а на краях значения равны 1. В точках экстремума $g'(x) = 0$. Найдем x, решив соответствующее уравнение:

$$4ax^3 - 2(a-1)x = 0; \text{ отсюда}$$

$$x^2 = \frac{a-1}{2a}.$$

Теперь подставим это значение в функцию: $g\left(\sqrt{\dfrac{a-1}{2a}}\right) = -1$. Из этого уравнения найдем a.

$$a = 3 \pm 2\sqrt{2}.$$

Корень со знаком минус нам не подходит, потому что при этом a: $x^2 = \dfrac{a-1}{2a}$ будет отрицательно, что нас не устраивает.

Итого получаем полином: $g(x) = (3 + 2\sqrt{2})x^4 - (2 + 2\sqrt{2})x^2$.

Точки оптимального плана:

$$x_1 = -1,\ x_2 = -0.6436,\ x_3 = 0.6436,\ x_4 = 1. \tag{2.3}$$

2.4.2. Нахождение весов

Вычислим, аналогично теореме 4 многочлены L_i для полиномиальной функции регрессии степени 4, рассмотрим веса при $z = 2$:

Для этого запишем, явный вид многочленов:

- $L_1(z) = \dfrac{z \cdot (z-1)(z+0.6436)(z-0.6436)}{(-1)(-1-1)(-1+0.6436)(-1-0.6436)}$;
- $L_2(z) = \dfrac{z \cdot (z+1)(z-0.6436)(z-1)}{(-0.6436)(-0.6436-1)(-0.6436-0.6436)(-0.6436+1)}$;
- $L_3(z) = \dfrac{z \cdot (z+1)(z+0.6436)(z-1)}{(0.6436)(0.6436-1)(0.6436+0.6436)(0.6436+1)}$;
- $L_4(z) = \dfrac{z \cdot (z+1)(z+0.6436)(z-0.6436)}{(1+1)(1+0.6436)(1-0.6436)}$.

Теперь подставим точку $z = 2$ и запишем ответ, воспользовавшись приведенными выше формулами: $\omega_1 = 0.083$, $\omega_2 = 0.227$, $\omega_3 = 0.442$, $\omega_4 = 0.248$.

Итак, запишем получившийся C–оптимальный план для модели
$f(x) = (x, x^2, x^3, x^4)^{\mathrm{T}},\ \chi \in [-1, 1]$:

$$\xi = \begin{pmatrix} -1 & -0.6436 & 0.6436 & 1 \\ 0.083 & 0.227 & 0.442 & 0.248 \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

2.5. Построение планов экстраполяции для моделей произвольной четной степени

Найдем точки оптимального плана для полиномиальной регрессионной модели, где n — четно.

Теорема 5. Точки C–оптимального плана полиномиальной регрессионной модели без свободного члена: $f(x)^{\mathrm{T}} = (x, x^2, \ldots, x^n)$ для четного параметра $n = 2k$ на промежутке планирования $\chi = [-1, 1]$ находятся по формуле:

$$x_{\text{extr}} \in \left\{ \pm\sqrt{\frac{\cos\frac{i\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1 + \cos\frac{\pi}{2k}}} \right\}\ i = 0...k-1.$$

Доказательство.

Для нахождения точек C–оптимального плана сначала найдем такой многочлен $P(x)$ степени $2k$, что $|P(x)| \leq 1$, где $x \in [-1,1]$, при этом равенство достигается в $2k$ точках.

Найдем многочлен $Q(x)$ степени k, такой, что $|Q(x)| \leq 1$, где $x \in [0,1]$, при этом равенство достигается в k точках.

Воспользуемся для решения этой задачи многочленами Чебышева степени k — $T_k(x)$. Рассмотрим наименьший корень этого многочлена. $x_{\min} = -\cos\frac{\pi}{2k}$.

Сделаем линейную замену переменных так, чтобы отрезок $[-\cos\frac{\pi}{2k}, 1]$ перешел в отрезок $[0,1]$.

$$Q(x) = T_k\left((x(1+\cos\frac{\pi}{2k}) - \cos\frac{\pi}{2k})\right).$$

Многочлен $P(x)$ получается из многочлена $Q(x)$ преобразованием $P(x) = Q(x^2)$.

Точки оптимального плана получаются аналогичными преобразованиями точек локальных экстремумов многочленов Чебышева. Точки экстремумов многочлена Чебышева k–ой степени имеют вид: $x_i = \cos\left(\frac{i\pi}{k}\right)$, $i = 0, \ldots, k$.

Точки экстремума получившегося полинома находятся следующим образом: найдем такие точки у многочлена $Q(x)$. Они получаются аналогичными преобразованиями точек $\cos(\frac{i\pi}{k})$, $i = 0...k-1$. Пусть s является точкой экстремума многочлена $Q(x)$. Тогда точки $\pm\sqrt{s}$ будут точками экстремума многочлена $P(x)$. Итого сделав обратные действия к преобразованиям получаем требуемое:

$$x_{\text{extr}} \in \left\{\pm\sqrt{\frac{\cos\frac{i\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1+\cos\frac{\pi}{2k}}}\right\} \; i = 0...k-1.$$

Заметим также, что этот план удовлетворяет условиям теоремы Элвинга. Многочлен $|T_k(x)| \leq 1$ на отрезке $[-\cos\left(\frac{\pi}{2k}\right), 1]$. По линейному преобразованию многочлен $|Q(x)| \leq 1$ на отрезке $[0,1]$. Из преобразования $Q(x) \mapsto P(x)$ очевидно следует, что получившийся многочлен $|P(x)| \leq 1$. Достижение точек экстремумов $|P(x)| = 1$ очевидно следует из построения.

На рисунке 2.1 продемонстрирован такой многочлен $P(x)$ в случае $n = 4$.

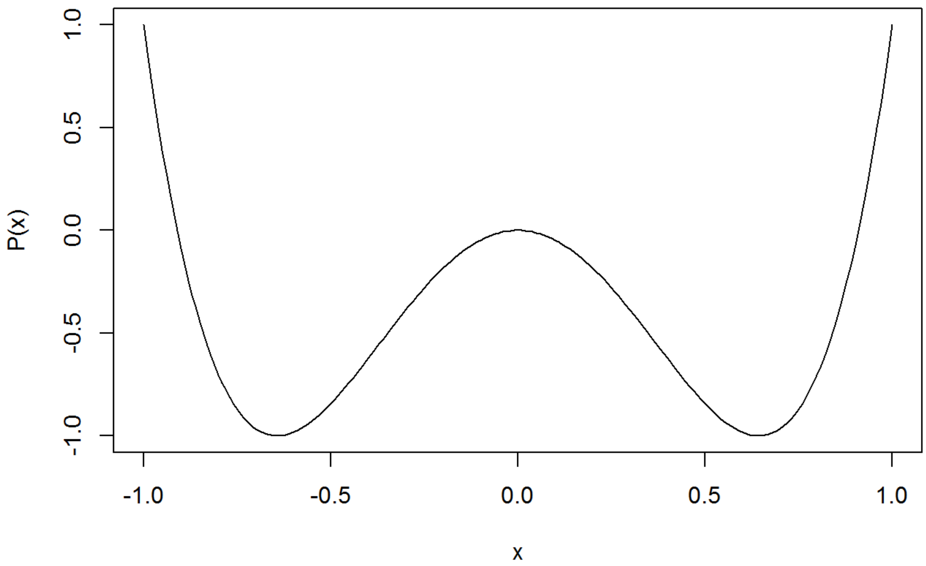

Рис. 2.1. Многочлен $P(x)$.

2.6. Построение планов экстраполяции для множества планирования в виде произвольного отрезка

Разберем задачу нахождения точек C–оптимального плана для полиномиальной модели без свободного члена: $f(x)^{\mathrm{T}} = (x, \ldots, x^n)$ в общем случае $\chi = [a, b]$.

Теорема 6. Точки C–оптимального плана полиномиальной регрессионной модели без свободного члена: $f(x)^{\mathrm{T}} = (x, \ldots, x^n)$ для четного параметра n на промежутке планирования $\chi = [a, b]$ находятся по формуле:

$$x_{extr} = \left\{ \pm\sqrt{\frac{\cos\frac{i\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1 + \cos\frac{\pi}{2k}}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{a+b}{2} \right\}.$$

Известен нужный нам многочлен $P_n(x)$ на отрезке $x \in [-1, 1]$. Растяжением приведем отрезок $[-1, 1]$ к отрезку длины $b - a$. То есть получим полином на отрезке $x \in \left[\frac{a-b}{2}, \frac{b-a}{2}\right]$ Назовем этот многочлен $R(x)$. Он будет равен:

$$R(x) = P\left(x \cdot \frac{2}{b-a}\right).$$

Осталось лишь сдвинуть его так, чтобы точка $\frac{a-b}{2}$ оказалась в точке a. Для этого нужно многочлен $R(x)$ сместить на величину $a - \frac{a-b}{2}$. Запишем получившийся многочлен, обозначив его $S(x)$:

$$S(x) = R\left(x - \left(a - \frac{a-b}{2}\right)\right) = P\left(\left(x - \frac{a+b}{2}\right) \cdot \frac{2}{b-a}\right).$$

Соответственно точки экстремума будут иметь следующий вид:

$$x_{extr} = \left\{ \pm\sqrt{\frac{\cos\frac{i\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1+\cos\frac{\pi}{2k}}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{a+b}{2} \right\}.$$

Глава 3

Планы для оценивания производной

3.1. Описание задачи

Рассмотрим задачу построения оптимальных планов для оценивания производной функции регрессии в некоторой фиксированной точке. Для случая обычной полиномиальной модели эта задача была недавно исследована в работе [5]. Оказалось, что существует три типа интервалов значений точки, в которой оценивается производная, которые отличаются видом экстремального многочлена. Первый тип авторы работы [5] называют чебышевским, так как экстремальный полином для этих значений – это многочлен Чебышева соответствующей степени. Второй тип называется получебышевским. В этом случае экстремальный многочлен получается из многочлена Чебышева линейной заменой переменных, причем число опорных точек в оптимальном плане на единицу меньше числа оцениваемых параметров. Для третьего типа промежутков, которые названы нечебышевскими, число опорных точек в оптимальном плане будет на единицу меньше числа оцениваемых параметров, так как в этом случае экстремальный многочлен не может быть получен из многочлена Чебышева линейной заменой переменной. Таким образом число опорных точек в оптимальном плане или равно числу параметров модели, или на единицу меньше. Более того, для обычной полиномиальной регрессии любой допустимый план имеет число опорных точек не меньше, чем число параметров минус 1 (теорема 2.1 из работы [5]). Это утверждение сохраняет силу для полиномиальных моделей без свободного члена, что может быть доказано повторением рассуждений из работы [5].

Пусть $f^T(x) = (x, x^2, \dots, x^n)$, $n = 2k+1$, то есть рассматривается полиномиальная модель нечетной степени без свободного члена.

Для $k = 0$ непосредственное вычисление показывает, что два одноточечных плана , план в точке -1 и план в точке 1 являются оптимальными для оценивания производной в любой точке.

Для $k = 1$ мы покажем далее, что есть только два типа промежутков (в терминологии работы [2]) — чебышевский и получебышевский. Мы предполагаем, что такое утверждение сохраняет силу для моделей произвольной нечетной степени, но строгое доказательство этого предположения получить не удалось.

Для модели $f^T(x) = (x, x^2, \dots, x^n)$, $n = 2k$, то есть для модели четной степени нами получено полное решение задачи при $k = 1, 2$.

Оказалось, что уже в случае $k = 2$ имеется три типа экстремальных многочленов, это многочлен Чебышева степени $2k - 1$, многочлен, построенный в предыдущей главе и многочлен, который не может быть получен из двух предыдущих линейной заменой переменной.

Далее мы приводим полное решение задачи для многочленов второй, третьей и четвертой степеней.

3.2. Решение задачи размерности 2

Рассмотрим полиномиальную квадратичную регрессионную модель без свободного члена $f(x) = (x, x^2)^{\mathrm{T}}$. Найдем C–оптимальный план такой, где $c = f'(x)$. Запишем явно: $c = (1, 2z)^{\mathrm{T}}$ для $z \in \mathbb{R}$.

Рассмотрим многочлен, удовлетворяющий условиям теоремы Элвинга: $P(x) = x^2$. Многочлены для вычисления весов плана оценивания производной по теореме 4 будут производными от интерполяционных многочленов. Вычислим их. $L_1(x) = \dfrac{x^2 - x}{2}$, $L_2(x) = \dfrac{x^2 + x}{2}$. Производные будут равны: $L_1'(x) = x - \frac{1}{2}$, $L_2'(x) = x + \frac{1}{2}$.

Аналогично теореме 4 получается, что веса вычисляются по формуле: $\omega_1(z) = = \dfrac{|L_1'(z)|}{|L_1'(z)| + |L_2'(z)|}$, $\omega_2(z) = \dfrac{|L_2'(z)|}{|L_1'(z)| + |L_2'(z)|}$. При $z \notin [-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}]$: $|L_1'(z)| + |L_2'(z)| = \pm 2z$. Итого получаем план:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \dfrac{1}{2} - \dfrac{1}{4z} & \dfrac{1}{2} + \dfrac{1}{4z} \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим другой промежуток: $z \in [-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}]$. В этом случае $|L_1'(z)| + |L_2'(z)| = 1$, а следовательно веса, вычисленные по формуле, получаются равными: $\dfrac{1}{2} - z$, $\dfrac{1}{2} + z$, в этом случае план имеет следующий вид:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \dfrac{1}{2} - z & \dfrac{1}{2} + z \end{pmatrix}.$$

В этом случае экстремальный многочлен $P(x) = x$. Запишем ответ:

$$\text{При } z \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \quad \xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \frac{1}{2} - z & \frac{1}{2} + z \end{pmatrix}$$

$$\text{При } x \in \mathbb{R}/[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \quad \xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1/2 - \frac{1}{4z} & 1/2 + \frac{1}{4z} \end{pmatrix}.$$

Проверим наш результат по теореме Элвинга: Пункты 1 и 2 выполнены по построению. Осталось проверить лишь третий пункт: существует такое число h, что $c = h\sum_{i\in 1:n} f(x_i)\omega_i p^T f(x_i)$.

Рассмотрим случай $x \in \mathbb{R}\backslash[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. Заметим, что в этом случае $p^T f(x_{1,2}) = 1$.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (0.5 - \frac{1}{4z}) + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (0.5 + \frac{1}{4z}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2z} \\ 1 \end{pmatrix},$$

В этом случае коэффициент h будет равным $2z$.

Запишем случай $z \in [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. В этом случае: $p^T f(x_1) = -1$, $p^T f(x_2) = +1$, так как экстремальный многочлен $P(x) = x$.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2z \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (\frac{1}{2} - z) + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (\frac{1}{2} + z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2z \end{pmatrix}$$

В этом случае коэффициент h будет равным 1.

3.3. Решение задачи размерности 3

В размерности 3 регрессионная модель: $f(x) = (x, x^2, x^3)^{\mathrm{T}}$, $c = f'(z) = (1, 2z, 3z^2)^{\mathrm{T}}$.

Многочлен, удовлетворяющий условиям теоремы Элвинга: $P(x) = 4x^3 - 3x$.

Этот многочлен имеет 4 точки экстремумов на отрезке $[-1, 1]:\ -1;\ -0.5;\ 0.5\ 1$. Однако точек оптимального плана можно уменьшить до 3, так как по теореме Элвинга существует оптимальных план с числом опорных точек, не превосходящим число параметров. В связи с этим возникает 4 варианта, в каждом из которых мы отбрасываем одну точку и рассматриваем 3 оставшихся как точки оптимального плана. Для этих четырех вариантов запишем экстраполяционные многочлены и их производные. Рассмотрим также корни производной. Знак значения производной многочлена в точках должен или совпадать с значением многочлена $P(x)$ в соответствующей точке, для всех точек, или быть противоположным, так же для всех точек.

3.3.1. Вариант первый

Исключим точку -1. Такой план (получившийся в результате исключения этой точки) в дальнейшем будем называть ξ_1.

Запишем интерполяционные многочлены для точек $-1/2, 1/2, 1$ для вычисления весов в точках. Запишем производные интерполяционных многочленов.

Для точки $-1/2$: $L_1(x) = \dfrac{x \cdot (x-0.5)\cdot(x-1)}{(-0.5)\cdot(-0.5-1)\cdot(-0.5-0.5)} = -4/3x^3 + 2x^2 - 2/3x$; $L_1'(x) = -4x^2 + 4x - 2/3$. Этот многочлен имеет корни: $0.5 \pm \frac{1}{2\sqrt{3}} \approx 0.211,\ 0.789$.

Для точки $1/2$: $L_2(x) = \dfrac{x\cdot(x-1)\cdot(x+0.5)}{0.5\cdot(1/2-1)\cdot(1/2+0.5)} = -4x^3 + 2x^2 + 2x$; $L_2'(x) = -12x^2 + 4x + 2$. Этот многочлен имеет корни: $\frac{1}{6} \pm \frac{\sqrt{7}}{6} \approx -0.274,\ 0.608$.

Для точки 1: $L_3(x) = \dfrac{x\cdot(x+0.5)\cdot(x-0.5)}{1\cdot(1+0.5)\cdot(1-0.5)} = 4/3\cdot x^3 - 1/3\cdot x$; $L_3'(x) = 4\cdot x^2 - 1/3$. Этот многочлен имеет корни: $\pm\frac{1}{2\sqrt{3}} \approx -0.289,\ 0.289$.

Вычислив веса по формуле: $\omega_i(z) = \dfrac{|L_i'(z)|}{|L_1'(z)| + |L_2'(z)| + |L_3'(z)|}$, $i = 1,2,3$, получим, что первый раз веса обнуляются в точках $-0.289, 0.789$.

3.3.2. Второй вариант

Исключим точку 1. Такой план в дальнейшем будем называть ξ_2.

Аналогично возьмем точки -1, $-1/2$, $1/2$.

Для точки -1: $L_1'(x) = -4x^2 + 1/3$. Этот многочлен имеет корни: $\pm\frac{1}{2\sqrt{3}} \approx -0.289,\ 0.289$.

Для точки $-1/2$: $L_2'(x) = 12x^2 + 4x - 2$. Этот многочлен имеет корни: $-\frac{1}{6} \pm \frac{\sqrt{7}}{6} \approx 0.274,\ -0.608$.

Для точки $1/2$: $L_3'(x) = 4x^2 + 4x + 2/3$. Этот многочлен имеет корни: $-0.5 \pm \frac{1}{2\sqrt{3}} \approx -0.789,\ -0.211$.

3.3.3. Третий вариант

Исключим точку $1/2$. Такой план в дальнейшем будем называть ξ_3.

Возьмем точки -1, $-1/2$, 1.

Проведем для них аналогичные действия.

Для точки -1: $L_1'(x) = -3x^2 + x + 0.5$; Корни производной: $\frac{1}{6} \pm \frac{\sqrt{7}}{6} \approx -0.274,\ 0.608$.

Для точки $-1/2$: $L_2'(x) = 8x^2 - 8/3$; Корни производной: $\pm\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0.577, 0.577$.

Для точки 1: $L_3'(x) = x^2 + x + 1/6$; Корни производной:
$-0.5 \pm \frac{1}{2\sqrt{3}} \approx -0.789,\ -0.211$.

3.3.4. Четвертый вариант

Исключим точку $-1/2$. Такой план в дальнейшем будем называть ξ_4.

Возьмем точки -1, $1/2$, 1.

Для точки -1: $L_1'(x) = -x^2 + x - 1/6$; Корни производной:
$0.5 \pm \frac{1}{2\sqrt{3}} \approx 0.211,\ 0.789$.

Для точки $1/2$: $L_2'(x) = -8x^2 + 8/3$; Корни производной: $\pm\frac{1}{\sqrt{3}} \approx -0.577, 0.577$.

Для точки 1: $L_3'(x) = 3x^2 + x - 0.5$; Корни производной:$-\frac{1}{6} \pm \frac{\sqrt{7}}{6} \approx 0.274,\ -0.608$.

Итак, мы получили 13 промежутков решения нашей задачи:

1. $(-\infty,\ -0.789)$.

Разберем полностью задачу для этого промежутка. Первый вариант, точки $-1/2$, $1/2$, 1. Они имеют значение полинома $P(x)$ 1, -1, 1. А на соответствующем промежутке значения $L_1'(x) < 0,\ L_2'(x) < 0,\ L_3'(x) > 0$. Следовательно, этот вариант нам не подходит, так как знаки должны или совпадать или быть противоположными, чтобы соблюдался пункт 3 теоремы Элвинга. Второй вариант, точки -1, $-1/2$, $1/2$. Они имеют значение полинома $P(x)$ -1, -1, 1. А на соответствующем промежутке $L_1'(x) < 0,\ L_2'(x) > 0,\ L_3'(x) < 0$. Следовательно, он нам не подходит. Третий вариант, точки -1, $-1/2$, 1. Они имеют значение полинома $P(x)$ -1, 1, 1. А на соответствующем промежутке значения $L_1'(x) < 0,\ L_2'(x) > 0,\ L_3'(x) > 0$. Следовательно, он нам подходит. Четвертый вариант, точки -1, $1/2$, 1. Они имеют значения полинома $P(x)$ -1, -1, 1. А на соответствующем промежутке значения $L_1'(x) < 0,\ L_2'(x) < 0,\ L_3'(x) > 0$. Следовательно, нам подходят оптимальные планы ξ_3, ξ_4.

Запишем оставшиеся результаты в виде таблицы.

Таблица 3.1. Планы оценивания производной, при $n = 3$.

Промежуток	Подходящий план
$(-\infty,\ -0.789)$	$\xi_3,\ \xi_4$
$(-0.789,\ -0.608)$	$\xi_2,\ \xi_4$
$(-0.608,\ -0.577)$	ξ_2
$(-0.577,\ -0.289)$	нет подходящего плана
$(-0.289,\ -0.274)$	ξ_3
$(-0.274,\ -0.211)$	$\xi_1,\ \xi_3$
$(-0.211,\ 0.211)$	ξ_2
$(0.211,\ 0.274)$	$\xi_2,\ \xi_4$
$(0.274,\ 0.289)$	ξ_4
$(0.289,\ 0.577)$	нет подходящего плана
$(0.577,\ 0.608)$	ξ_1
$(0.608,\ 0.789)$	ξ_3
$(0.789,\ \infty)$	$\xi_3,\ \xi_4$

Во всех этих промежутках веса находятся по формуле, полученной аналогично 2.1: $\omega_i(x) = \dfrac{L_i'(x)}{\sum_{j=1}^{3} L_j'(x)}$.

Для оставшихся промежутков: $(-0.577,\ -0.289)$, $(0.289,\ 0.577)$ плана в таком виде не существует. Для нахождения плана на этих промежутках рассмотрим многочлен $P(x) = 4(ax)^3 - 3(ax)$. Если $a \in [0.5, 1]$, то у нас будут выполняться первые 2 условия теоремы Элвинга, а точки экстремума будут равны $\pm 1/(2a)$. Запишем 3-ий пункт теоремы Элвинга:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2z \\ 3z^2 \end{pmatrix} = h \cdot \left[\begin{pmatrix} -\frac{1}{2a} \\ \frac{1}{4a^2} \\ -\frac{1}{8a^3} \end{pmatrix} \omega_1 + \begin{pmatrix} \frac{1}{2a} \\ \frac{1}{4a^2} \\ \frac{1}{8a^3} \end{pmatrix} (1 - \omega_1) \right]$$

Запишем получившуюся систему уравнений:

$$\begin{cases} 1 = \dfrac{h}{2a} - \dfrac{h\omega_1}{a} \\ 2z = -\dfrac{h}{4a^2}, \quad h = 8az^2 \\ 3z^2 = \dfrac{h}{8a^3} - \dfrac{h\omega_1}{4a^3}. \end{cases}$$

Подставим h в первое и третье уравнение.

$$\begin{cases} 1 = 4az - 8az\omega_1 \\ 3z^2 = \dfrac{z}{a} - \dfrac{2\omega_1 z}{a} \end{cases} \quad \begin{cases} 1 = 4az - 8az\omega_1 \\ 3za = 1 - 2\omega_1 \end{cases} \quad \omega_1 = \frac{1 - 3za}{2}$$

Подставим ω_1 в первое уравнение:

$$1 = 4az - 4az(1 - 3za),\ 12a^2z^2 = 1,\ a = \frac{1}{2\sqrt{3}|z|}$$

Рассмотрим границы нашего интервала $z \in [0.289, 0.577]$. Из монотонности a получаем, что $a \in [0.5, 1]$. $\omega_1 = \dfrac{1 - 3/(2\sqrt{3})}{2}$, $\omega_2 = \dfrac{1 + 3/(2\sqrt{3})}{2}$ при $z > 0$ и наоборот при $z < 0$.

3.4. Решение задачи размерности 4

Рассмотрим решение по нахождению точек оптимального плана, аналогичное решению задачи той же размерности задачи нахождения плана экстраполяции 2.3. Запишем для данных точек веса по формуле: $\omega_i(x) = \dfrac{|L_i'(x)|}{\sum_{j=1}^4 |L_j'(x)|}$. Рассмотрим многочлены $L_i'(x)$ и их корни, чтобы понять, на каких точках z этот план будет применим.

Запишем многочлен производной для точки -1: $L_1'(x) = 0.353564 - 0.707128x - 2.56069x^2 + 3.41426x^3$. Корни этого многочлена: -0.4027, 0.3023, 0.8503.

Для точки -0.6436: $L_2'(x) = -1.32623 + 4.1213x + 3.9787x^2 - 8.2426x^3$. Корни этого многочлена: -0.6552, 0.2894, 0.8485.

Для точки 0.6436: $L_3'(x) = 1.32623 + 4.1213x - 3.9787x^2 - 8.2426x^3$. Корни этого многочлена: 0.6552, -0.2894, -0.8485.

Для точки 1: $L_4'(x) = -0.353564 - 0.707128x + 2.56069x^2 + 3.41426x^3$. Корни этого многочлена: 0.4027, -0.3023, -0.8503.

Заметим, что корни симметричны. Расположим их в порядке возрастания на отрезке $[0, \infty)$: 0, 0.2894, 0.3023, 0.4027, 0.6552, 0.8485, 0.8503. В дальнейшем рассмотрим эту задачу на промежутке $[0, \infty)$.

Аналогично рассуждению приведенного в задаче размерности 3, получили, что данный четырехточечный план подходит для промежутков $(0.3023,\ 0.4027)$ и $[0.8503, \infty)$.

Рассмотрим неисследованные случаи: Для них рассмотрим план, состоящий из четырех точек, у которого в теореме Элвинга многочлен $P(x) = 4x^3 - 3x$ это многочлен Чебышева третьей степени. Точки оптимального плана: -1, -0.5, 0.5, 1. Аналогично рассмотрев многочлены L_1', L_2', L_3', L_4'. запишем их корни в порядке возрастания. 0, 0.235, 0.25, 0.309, 0.663, 0.804, 0.809.

Этот план является оптимальным планом оценивания производной для $z \in [0,\ 0.235] \cup [0.663,\ 0.804]$.

Для оставшихся промежутков пока не удалось построить план аналитически. Приведем нами разработанный алгоритм, по которому можно найти план для любой точки z не принадлежащей ни одному промежутку, в котором удалось построить план аналитически.

Из теоремы Элвинга вытекает, что для оставшихся промежутков справедливо следующее утверждение.

Обозначим $\underline{L_i}[u,t](x), i = 1,2,3$ – интерполяционные многочлены, построенные по точкам $x_1 = -1,\ x_2 = u,\ x_3 = i.$

$\overline{L_i}[u,t](x), i = 1,2,3$ — интерполяционные многочлены, построенные по точкам $x_1 = u,\ x_2 = t,\ x_3 = 1.$

Тогда $\underline{\omega_i}(z) = \dfrac{|\underline{L_i}'[u,t](z)|}{\sum_{j=1}^{3} |\underline{L_j}'[u,t](z)|}$

Тогда $\overline{\omega_i}(z) = \dfrac{|\overline{L_i}'[u,t](z)|}{\sum_{j=1}^{3} |\overline{L_j}'[u,t](z)|}$

Идея алгоритма состоит в том, чтобы подобрать такие u, t, для которых выполнены все условия теоремы Элвинга. При этом все оставшиеся неизвестные, как веса и коэффициенты полинома, выразить с помощью u, t.

Многочлен удовлетворяющий теореме Элвинга назовем: $P(x) = ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx$, где a, b, c, d — неизвестные коэффициенты. Составим систему уравнений, с помощью которой найдем их.

Для любого z принадлежащего одному из оставшихся промежутков существуют числа $-1 < u < t < 1$, такие, что хотя бы один из планов является оптимальным для оценивания производной функции регрессии в точке $z = x$. Составим систему уравнений, в которой предполагаем, что u, t нам известны:

$$\begin{cases} a + b + c + d = 1 \\ at^4 + bt^3 + ct^2 + dt = -1 \\ au^4 + bu^3 + cu^2 + du = -1 \\ 4at^3 + 3bt^2 + 2ct + d = 0 \end{cases}$$

Первое уравнение это значение многочлена в точке 1, которая по нашему предположению, не умаляя общности, есть точка нашего плана. Второе и третье это аналогичные условия на точки t и u. Четвертое условие вытекает из того, что производная в точке t равна 0, так как полином $|P(x)| \leq 1$. Из этой системы находим искомые коэффициенты. Однако существует условие на равенство 0 производной в точке u: $4au^3 + 3bu^2 + 2cu + d = 0$.

Вычислим многочлены $L'_1(x)$, $L'_2(x)$, $L'_3(x)$ по полученным точкам. Получим сами веса с помощью полученной формулы 2.1. Заметим, что из доказательства следует, что эта формула гарантирует нам выполнение третьего условия теоремы Элвинга только в первых трех компонентах вектора c:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \cdot z \\ 3 \cdot z^2 \\ 4 \cdot z^3 \end{pmatrix} = h \cdot \left[-\begin{pmatrix} u \\ u^2 \\ u^3 \\ u^4 \end{pmatrix} \omega_1 - \begin{pmatrix} t \\ t^2 \\ t^3 \\ t^4 \end{pmatrix} \omega_2 + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \omega_3 \right]$$

Знаки перед слагаемыми поставлены в соответствии с аналогичными рассуждениями для размерности 3.

Рассмотрим ошибку, которая зависит от наших u, t. Она состоит из двух компонент: ошибка равенства 0 производной и ошибка 4–ой компоненты векторного равенства. Минимизируем ее по u, t:

$$\Phi(u,t) = \underbrace{(4au^3 + 3bu^2 + 2cu + d)^2}_{\text{ошибка } P'(u)=0} + \underbrace{(4z^3 + h(u^4\omega_1 + t^4\omega_2) - h\omega_3)^2}_{\text{ошибка 3–его условия т. Элвинга}} \mapsto \min_{u,t \in [-1,1]}.$$

Сделав это для точки $z = -0.5$ с шагом по $u, t \in [-1, 1]$ равным 10^{-4} получаем план:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -0.8169 & 0.6113 & 1 \\ 0.7993 & 0.1952 & 0.0055 \end{pmatrix}.$$

Получили $\Phi(-0.8169,\ 0.6113) = 4.754 \cdot 10^{-7}$.

На 3.1 изображен экстраполяционный многочлен $P(x)$ для решения этой задачи.

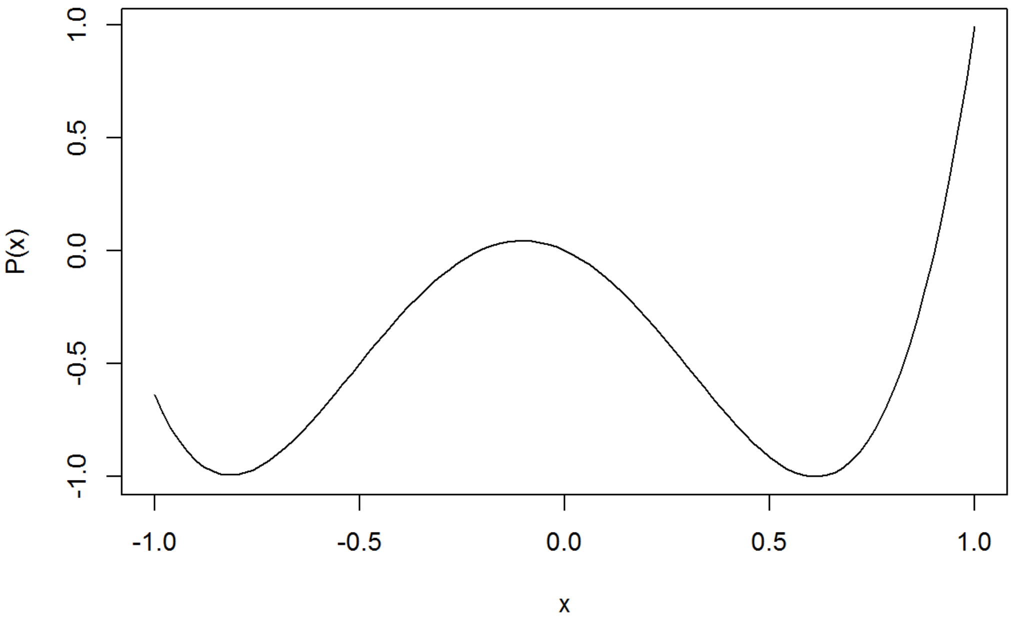

Рис. 3.1. Многочлен $P(x)$ в случае $z = -0.5$.

Глава 4

Сравнение C–оптимальных планов с D–оптимальным

4.1. Сравнение плана экстраполяции

Сравним план экстраполяции модели: $f(x) = (x, x^2, x^3, x^4)^{\mathrm{T}},\ \chi \in [-1, 1], z = 2$:

$$\xi_1 = \begin{pmatrix} -1 & -0.6436 & 0.6436 & 1 \\ 0.083 & 0.227 & 0.442 & 0.248 \end{pmatrix}.$$

И D–оптимальный план этой же модели [9]:

$$\xi_2 = \begin{pmatrix} -1 & -0.654 & 0.654 & 1 \\ 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \end{pmatrix}.$$

4.1.1. Сравнение по C–критерию оптимальности

Для того, чтобы сравнить эти планы по C–критерию, возьмем отношение значения критерия при $c = (2, 2^2, 2^3, 2^4)^{\mathrm{T}}$:

$$\frac{c^T M^{-1}(\xi_2) c}{c^T M^{-1}(\xi_1) c}.$$

Для плана экстраполяции по критерию C–оптимальности получим значение критерия равным 5467. Для D–оптимального плана по этому же критерию получим значение критерия равным 6879. Итого:

$$\frac{6879}{5467} = 1.26.$$

4.1.2. Сравнение по D–критерию оптимальности

Для того, чтобы сравнить эти планы по D–критерию, возьмем отношение значения критерия:

$$\frac{\sqrt[4]{M(\xi_1)}}{\sqrt[4]{M(\xi_2)}}.$$

Для D–оптимального плана по критерию D–оптимальности получим значение $5.24 \cdot 10^{-4}$. Для плана экстраполяции по этому же критерию получим $2.76 \cdot 10^{-4}$. Итого:

$$\frac{\sqrt[4]{5.24}}{\sqrt[4]{2.76}} = 1.17.$$

Из этих результатов сделали вывод, что для плана экстраполяции нужно сделать на 17% экспериментов больше, чтобы достичь той же точности D–критерия. А для D–оптимального плана нужно сделать на 26% экспериментов больше, чтобы достичь той же точности C–критерия. Также планы экстраполяции для данной регрессионной модели хуже по D–критерию, нежели D–оптимальные планы по C–критерию.

Нарисуем график зависимости отношения D–оптимальных планов и плана экстраполяции соответствующих критериев от точки z, задающей вектор $c = (z, z^2, z^3, z^4)^{\mathrm{T}}$ рис.4.1. На графике красным цветом величина, характеризующая, во сколько раз больше результат плана по C–критерию от плана по D–критерию, по D–критерию. А черным цветом величина, характеризующая, во сколько раз больше результат плана по D–критерию от плана по C–критерию.

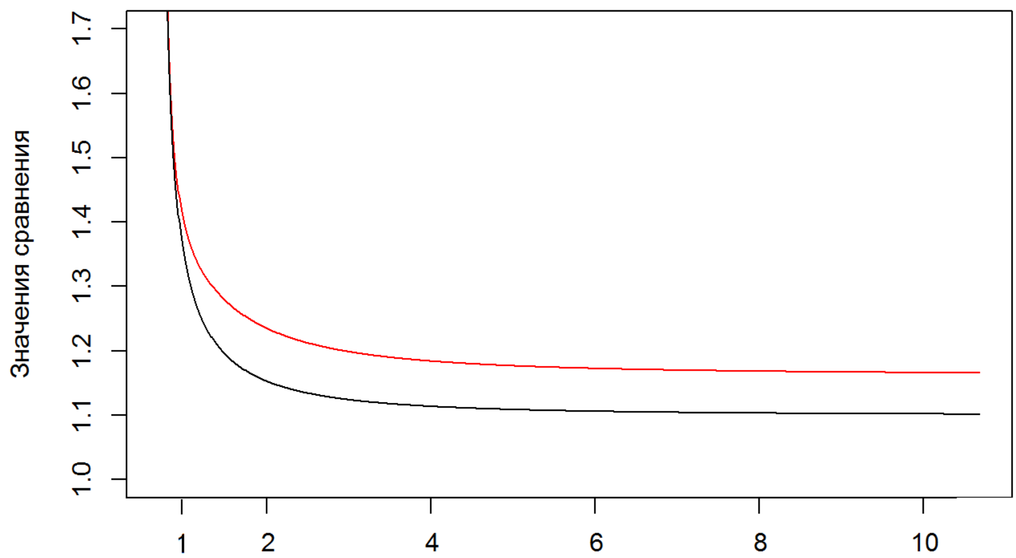

Рис. 4.1. Сравнение оптимальных планов.

Было получено, что асимптота по C–критерию $\approx 10\%$, а по D–критерию $\approx 16\%$.

Аналогично запишем результат для той же точки $z = 2$ в сравнении планов оценивания производной.

4.2. Сравнение плана оценивания производной

Сравним план оценивания производной: $f(x) = (x, x^2, x^3, x^4)^{\mathrm{T}}$, $\chi \in [-1, 1]$, $c = (1, 2x, 3x^2, 4x^3)^{\mathrm{T}}$ с D–оптимальным, описанным выше.

Оптимальный план оценивания производной в точке $z = 2$:

$$\xi_3 = \begin{pmatrix} -1 & -0.6436 & 0.6436 & 1 \\ 0.096 & 0.258 & 0.432 & 0.214 \end{pmatrix}.$$

Результат сравнения по C–критерию:

$$\frac{c^T M^{-1}(\xi_2)c}{c^T M^{-1}(\xi_3)c} = 1.22.$$

Результат сравнения по D–критерию:

$$\frac{\sqrt[4]{M(\xi_3)}}{\sqrt[4]{M(\xi_2)}} = 1.14.$$

На графике сравнения красным цветом величина, характеризующая, во сколько раз больше результат плана по C–критерию от плана по D–критерию, по D–критерию. А черным цветом величина, характеризующая, во сколько раз больше результат плана по D–критерию от плана по C–критерию.

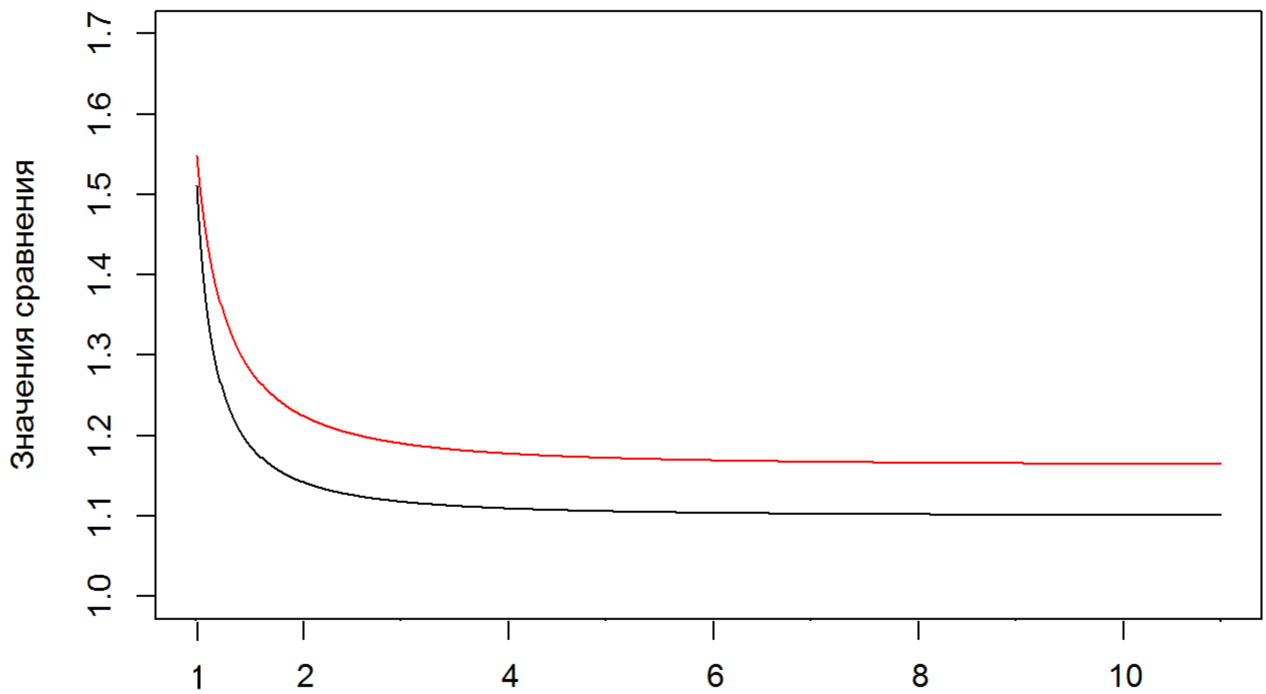

Рис. 4.2. Сравнение оптимальных планов.

Асимптоты сравнений совпадают, однако разница между планами экстраполяции и D–оптимальными несколько больше, чем между планами оценивания производной и D оптимальными. Также обратим внимание, что этот принцип сравнения действует для любого n.

Заключение

В своей дипломной работе я рассмотрел полиномиальные регрессионные модели без свободного члена.

В явном виде построены оптимальные планы экстраполяции для моделей произвольного порядка.

Построены планы оценивания производной аналитически в случае $n = 2, 3$. В случае $n = 4$ для некоторых интервалов значений z планы получены аналитически, а для остальных продемонстрирован алгоритм нахождения таких планов.

Продемонстрирована выгода результата плана экстраполяции и планов оценивания производной от D–оптимального плана по C критерию и, наоборот, для случая $n = 4$. Продемонстрирован принцип решения, то есть мы можем аналогично сделать не только для модели 4-ой степени, но и для любого n.

Список литературы

1. Fisher R. The Design of Experiments. — London : Oliver Boud, 1935.
2. Мелас В. Б., Шпилев П. В. Планирование и анализ для регрессионных моделей. — Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2014. — С. 45—62.
3. Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента. — М.: Наука, 1971.
4. Карлин С., Стадден В. Чебышевские системы и их применение в анализе и статистике. — М. : Наука, 1966. — С. 568.
5. Dette H., Pepelyshev A. Melas V.B. Optimal designs for estimating the slope of a regression // Statists. — 2010. — Vol. 44. — P. 617–628.
6. Pukelsheim F. Optimal Design of Experiments. — New York : John Wiley and Sons, 1993. — Vol. 7. — P. 158–186.
7. Карлин С., Стадден В. Чебышевские системы и их применение в анализе и статистике. — М. : Наука, 1966. — Т. 10. — С. 348–362.
8. Березин И. С., П.. Жидков Н. Методы вычислений. — М. : ГИФМЛ, 1962. — Т. 5. — С. 417–425.
9. Wong W., Chang C., Huang M. D-optimal designs for polynomial regression. // Statistica Sinica. — 1995. — no. 5. — P. 441–458.